University of Tehran Press

Journal of the Earth and Space Physics

Homepage: https://jesphys.ut.ac.ir

Vol. 49, No. 3, Autumn 2023, P. 649-667

(Research Article)

Application of Equation-Oriented Modeling in solving Diffusion Equation in Different Types of Networks

Farhadi, Sh.[1] | Mazaheri, M.[1]

1. Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

Corresponding Author E-mail: m.mazaheri@modares.ac.ir

(Received: 11 Sep 2022, Revised: 15 April 2023, Accepted: 26 Sep 2023, Published online: 15 Nov 2023)

Summary

Nowadays, network structures are found in many natural and engineered systems, e.g., river networks, microchannel networks, plant roots, human blood vessels, etc. Therefore, providing efficient methods for modeling phenomena such as diffusion, advection, etc. is very practical. One of the most common tools for modeling this phenomena is numerical modeling, as mathematics software is well- developed and powerful nowadays. In this research, a new approach called Equation-Oriented Modeling has been presented. In this approach each branch of the network has its own differential equation, and these branches are connected or coupled by boundary conditions. In other words, unlike classical modeling, EOM does not solve through the discretization of the partial differential equation in the whole domain of the network, while in this approach, each branch of the network has its own differential equation with its own specific diffusion coefficient and cross section area, then the problem is solved as a system of PDE. The main point of EOM is to formulate a physical problem in the network into a system of differential equations, which is finally solved by the Method of Lines. MOL is an efficient computational method used to solve partial differential equations or PDE systems. MOL is generally implemented in two steps, in the first step spatial derivatives are replaced by algebraic approximation. In the second step, the ordinary differential equation system is integrated with respect to time using any method, for example, in this research, we use the Runge-Kutta 4th order method. EOM was implemented to solve the diffusion equation in three types of networks, including tree-shaped and loop network. Then modeling results for 3 networks were presented as spatial concentration profiles in different paths in the networks. The model had reasonable results in the boundaries and branches according to the boundary conditions, loading and concentration functions, as well as the continuity of concentrations and loading by diffusion in the output results was reasonable. The boundary conditions that apply at the intersections of the branches include the continuity of concentration and the continuity of loading due to the diffusion phenomenon. The results of test case 3 were compared with another numerical model for validation, and three types of Error Parameters were calculated at different times between these two models. R-Squared (R^2) was calculated in path (1-2-3-5-9), and its value was 0.99-1, which was the optimal value. This coefficient shows that the results of the EOM and the other numerical model has the same trend. Then, RMSE and MAE were also calculated and their values were approximately zero for all times. The modeling results for 3 networks were presented as spatial concentration profiles in different paths in the networks. The first advantage of the EOM approach is that the choice of terms in the differential equation is left to the user rather than the software developer, so that a wider range of phenomena can be modeled and the effects of different terms can be seen in the modeling. The second advantage of this approach over classical modeling is that the equations are available to the user as tools and model elements, and modeling complex networks such as tree-shaped, and Loop networks is not as complicated as classical models. The third advantage of EOM is the tools available in mathematical programs for optimization or linking with other programs. Since the heat equation is similar to the diffusion equation, the results of this research can be used for other important topics, such as solving the heat equation in microchannel networks for cooling systems, modeling pollutant transport in river networks, or diffusion modeling of solutes in plant roots.

Keywords: Equaion-Oriented Modeling, Diffusion Equation, Method of Lines, Tree-shaped network, Loop network.

Cite this article: Farhadi, Sh., & Mazaheri, M. (2023). Application of Equation-Oriented Modeling in solving Diffusion Equation in Different Types of Networks. *Journal of the Earth and Space Physics*, 49(3), 649-667. DOI: http//doi.org/10.22059/jesphys.2023.348098.1007455

E-mail: (1) shayan.farhadi@modares.ac.ir

CC BY NC

Publisher: University of Tehran Press.

DOI: http//doi.org/10.22059/jesphys.2023.348098.1007455

Print ISSN: 2538-371X

Online ISSN: 2538-390

انتشارات دانشگاه تهران

فیزیک زمین و فضا

نشانی اینترنتی مجله: http://jesphys.ut.ac.ir

دوره ۴۹، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۲، صفحهٔ ۶۴۹- ۶۶۷

(مقاله پژوهشی)

کاربست روش معادله‌گرا برای حل معادله پخش در شبکه‌های مختلف

شایان فرهادی[۱] | مهدی مظاهری[۱] ✉

۱. گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران.

رایانامه نویسنده مسئول: m.mazaheri@modares.ac.ir

(دریافت: ۱۴۰۱/۶/۲۰، بازنگری: ۱۴۰۲/۱/۲۶، پذیرش نهایی: ۱۴۰۲/۷/۴، انتشار آنلاین: ۱۴۰۲/۸/۲۴)

چکیده

امروزه ساختارهای شبکه‌ای در سیستم‌های طبیعی و مهندسی بسیار یافت می‌شوند، لذا استفاده از روش‌های کارآمد برای مدل‌سازی پدیده‌هایی مانند پخش و جابه‌جایی یک کمیت اسکالر (مانند دما یا غلظت) در این شبکه‌ها نمود پیدا می‌کند. یکی از روش‌های رایج برای مدل‌سازی این پدیده‌ها، مدل‌سازی عددی است. در این پژوهش با استفاده از روش معادله‌گرا پدیده یاد شده مدل‌سازی و بررسی شده‌است. در این تحقیق، روش اصلی در استفاده از روش معادله‌گرا، فرمول‌بندی پدیده پخش در کل شبکه به‌صورت یک دستگاه معادلات دیفرانسیل جزئی می‌باشد. درنهایت با اعمال شرایط مرزی مناسب در نقاط اتصال شبکه (با توجه به فیزیک پدیده)، دستگاه یادشده از طریق روش خطوط حل شد. رویکرد مذکور برای حل معادله پخش در سه نوع شبکه مختلف شامل درختی و حلقه‌ای به کار گرفته و نتایج بررسی شد. در مورد شبکه سوم، نتایج روش معادله‌گرا با نتایج روش عددی دیگر، که در آن یک معادله در کل شبکه با استفاده از روش تفاضل متناهی گسسته می‌شود، مورد مقایسه قرار گرفت. شاخص‌های خطا برای مقایسه مذکور حاکی از آن است که روش‌ها با یکدیگر همخوانی داشته که این امر بیانگر صحت کاربست روش معادله‌گرا می‌باشد. از مزیت‌های روش معادله‌گرا می‌توان به انعطاف‌پذیری بالای آن در مقایسه با روش‌های عددی پیشین و همچنین قابلیت آسان اعمال آن در بسته‌ها و ابزارهای عددی آماده، اشاره کرد.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی معادله‌گرا، معادله پخش، روش خطوط، شبکه درختی، شبکه حلقه.

۱. مقدمه

امروزه سیستم‌هایی که پدیده پخش (Diffusion) در آنها غالب است، در موارد متعددی مورد توجه هستند. از مصادیق این سیستم‌ها می‌توان به پدیده‌های انتقال گرما در میکروکانال‌ها، حرکت آب و املاح در مجموعه ریشه گیاهان یا خاک و پخش آلودگی در شبکه رودخانه‌ها اشاره کرد (چونگ و چوی، ۲۰۱۷). به‌طورکلی پخش فرایندی است که طی آن ماده در اثر حرکات تصادفی مولکولی از یک مکان به مکان دیگر منتقل می‌شود (کرنک، ۱۹۷۵). این پدیده توسط فیک (۱۸۵۵) کشف شد، که برای اولین‌بار با اتخاذ معادله ریاضی انتقال گرما که چند سال قبل‌تر توسط فوریه در سال ۱۸۲۲ به‌دست آمده‌بود، پدیده پخش را بر اساس آن فرمول‌بندی کرد. تحقیقات زیادی در زمینه حل معادله پخش در دامنه یک‌بعدی انجام شده‌است. به‌طور مثال شاشکو و استینبرگ (۱۹۹۶) از روش تفاضل متناهی (Finite Difference Method)، فان و لیو (۲۰۱۸) از روش عنصر متناهی (Finite Element Method) برای حل معادله پخش در یک دامنه استفاده کردند. اما امروزه مدل‌سازی ساختارهای شبکه‌ای اهمیت زیادی پیدا کرده‌اند و تقریباً در همه زمینه‌های زندگی یافت می‌شوند (چونگ و همکاران، ۲۰۰۷) و در طراحی بسیاری سیستم‌های ساخت بشر از ساختارهای شبکه‌ای موجود در طبیعت استفاده می‌شود (چن و چنگ، ۲۰۰۲). شبکه‌ها الگو و ساختار متفاوتی دارند، به‌طور مثال برخی شبکه‌ها دارای ساختار لانه زنبوری هستند که در بافت‌های زنده و توده‌های سلولی یافت می‌شود، برخی دیگر ساختار درختی دارند که در شبکه نورون‌ها، ریشه و شاخه‌های گیاهان، رگ‌های بدن برای توزیع خون، سیستم‌های رودخانه‌ای و

استناد: فرهادی، شایان و مظاهری، مهدی (۱۴۰۲). کاربست روش معادله‌گرا برای حل معادله پخش در شبکه‌های مختلف. *مجله فیزیک زمین و فضا*، ۴۹(۳)، ۶۴۹- ۶۶۷

DOI: http//doi.org/10.22059/jesphys.2023.348098.1007455

رایانامه: (۱) shayan.farhadi@modares.ac.ir

CC BY NC

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران.

DOI: http//doi.org/10.22059/jesphys.2023.348098.1007455

میکروکانال‌ها یافت می‌شود و جز ساختارهای رایج و مهم به‌شمار می‌آید (میگوئل و روچا، ۲۰۱۸). لذا به‌کارگیری یک روش کارآمد برای مدل‌سازی پدیده‌های مختلف از جمله انتقال جرم و گرما که محور اصلی تحقیق حاضر است، در شبکه‌ها اهمیت به‌خصوص دارد و تنها حل معادله دیفرانسیل در یک دامنه کافی نیست.

تحقیقات متعددی در خصوص حل معادله پخش در شبکه‌ها و محیط‌های چند فازی وجود دارد، به‌طور مثال ساندرز و همکاران (۱۹۷۱) در خصوص جذب املاح توسط شبکه ریشه گیاهان از خاک و پخش آن در گیاه پرداختند، نیارا و همکاران (۲۰۱۵) به مدل‌سازی پخش اکسیژن در خاک و محیط متخلخل پرداختند و همچنین لیو و همکاران (۲۰۱۸) از روش‌های عددی برای ارزیابی اثرات ویژگی‌های سنگ‌دانه بر ضریب پخش در بتن که یک محیط سه‌فازی است، استفاده کردند. کامپوس و همکاران (۲۰۰۴) به بررسی پدیده پخش در شبکه پرداختند و یک تابع نسبت به زمان و مکان برای رسانایی در فراکتال‌ها استخراج کردند که درنهایت از معادله پخش برای مدل‌سازی فرایندهای واکنش-پخش بر روی فراکتال‌ها و تجزیه‌وتحلیل خواص آنها استفاده کردند. سیمون و کویا (۲۰۱۵) از معادله پخش-واکنش برای مدل‌سازی انتقال آلودگی در رودخانه استفاده کردند و برای این منظور ابتدا جمله مربوط به پخش و واکنش را با استفاده از روش تقسیم از معادله اصلی جدا کردند و سپس از روش‌های عددی مانند کرانک-نیکلسون و رونگ-کوتا درجه چهار برای گسسته‌سازی و حل معادله استفاده کردند. میلیسیچ و همکاران (۲۰۲۰) به بررسی و ارزیابی ضرایب پخش و کالیبراسیون این ضرایب پرداختند و همچنین یک رویکرد مدل‌سازی عددی برای پخش آنی آلودگی در شبکه رودخانه نرتوا ارائه دادند و از مدل عددی یک‌بعدی مایک ۱۱ در این پژوهش استفاده شد. جانسون و همکاران (۱۹۹۵) به بررسی شبکه‌های رودخانه‌ای و مناطق ساحلی پرداختند و حرکت ارگانیسم‌ها را در این شبکه‌ها با معادله پخش توصیف کردند و عنوان کردند که پدیده پخش در چنین شبکه‌هایی به هندسه شبکه، رفتار حرکتی ارگانیسم‌ها و مش‌بندی در مکان و زمان بستگی دارد. ژنگ و همکاران (۲۰۱۳) یک مدل ریاضی برای تعیین ضریب پخش گاز در محیط‌های متخلخل در شبکه درختی Y شکل ارائه دادند که مدل پیشنهادی به‌عنوان تابعی از طول، قطر، سطح مقطع انشعاب، زاویه انشعاب و تخلخل سطح بود. دادور و سهیمی (۲۰۰۷) معادله پخش را با دو جمله واکنش غیرخطی مورد در شبکه متخلخل و به کار بردند و نتایج را در حالت وجود جمله واکنش و عدم‌وجود واکنش مقایسه کردند و نتایج نشان داد، جواب‌ها در این دو حالت به‌طور قابل‌توجهی متفاوت است.

آگاهی عمومی در میان دانشمندان و مهندسان وجود دارد که معادله دیفرانسیل انتقال جرم توسط پدیده پخش با انتقال گرما اساساً یکسان هستند و تنها در ضرایب با یکدیگر اختلاف دارند (کارسلاو و جاگر، ۱۹۵۹). در چند دهه گذشته تحقیقات بسیار زیادی در زمینه مدل‌سازی انتقال گرما در انواع شبکه‌ها صورت گرفته است (ژنگ و همکاران، ۲۰۱۷)، به‌طور مثال ژو و همکاران (۲۰۰۹) چندین شبکه خیلی کوچک متشکل از میکرو کانال درختی با ساختار حلقه‌ای را مورد بررسی قرار دادند که معادله انتقال گرما در آنها حل شد. ژو و همکاران (۲۰۱۶) به بررسی جریان سیال و انتقال گرما در شبکه‌های درختی پرداختند و درواقع این پژوهش مروری بر پیشینه تحقیقات انجام‌شده در سال‌های اخیر در مورد مسئله انتقال جرم و گرما در شبکه‌های درختی و همچنین کاربردهای این نوع از شبکه‌ها در تکنولوژی بود. در تحقیق یاد شده موضوعات جانبی شامل بهینه‌سازی شبکه‌های درختی، قوانین مقیاس بندی شبکه‌های درختی و خواص انتقال جرم در جریان آرام، جریان آشفته، انتقال گرما در شبکه‌های درختی و همچنین تأثیر پارامترهای انشعاب بر خواص انتقال جرم و گرما مورد بحث قرار گرفت. ناوروس و همکاران (۲۰۱۶) از معادله دیفرانسیل گرما برای توصیف انتقال گرما در جامدات در یک محیط پیوسته پرداختند و برای این منظور از فرم ضعیف (Weak Form) معادله گرما استفاده کردند و با استفاده از

روش عنصر متناهی که توسط گیلبرت استرنگ معرفی شده بود، فرم ضعیف شده معادله گرما را به‌صورت دستگاهی از معادلات دیفرانسیل و جبری درآوردند و سپس حل کردند.

در این پژوهش از روش معادله‌گرا برای مدل‌سازی انتقال جرم و گرما در شبکه‌های مختلف استفاده شده‌است. مدل‌سازی معادله‌گرا یک مدل ریاضی است که از معادلات برای ارائه ارتباط متقابل و پویا در یک شبکه استفاده می‌کند (تاورنچاک، ۲۰۰۱). به‌عبارت‌دیگر در روش مذکور، ابتدا شبکه به بخش‌های کوچک‌تر و شاخه‌های تشکیل‌دهنده خود تبدیل‌شده و سپس برای هر شاخه، معادله دیفرانسیل مربوطه با توجه به دامنه و پارامترهای خاص خود تعریف می‌شود. سپس ارتباط متقابل بین شاخه‌ها از طریق شروط مرزی که در گره‌ها اعمال می‌شود، لحاظ‌شده و با استفاده از تکنیک‌های ابتکاری دستگاه معادله دیفرانسیل جزئی تشکیل داده می‌شود. تبدیل مسئله حل معادله دیفرانسیل در شبکه به یک دستگاه سبب می‌شود که رویکرد حل معادله‌گرا در هر نرم‌افزار عمومی ریاضی جهت حل دستگاه معادله دیفرانسیل قابل‌اجرا باشد و میزان کدنویسی در چنین شبکه‌هایی کاهش‌یافته و ساده‌تر شود. در حالی که در روش‌های عددی قدیمی‌تر عموماً یک معادله در کل شبکه گسسته‌سازی می‌شود و دستگاه معادلات حاصله به‌صورت یک دستگاه واحد برای کل شبکه تشکیل می‌شود که این موضوع برای حل شبکه‌های حلقه‌ای و درختی با پیچیدگی‌هایی همراه بوده و زمان‌بر است و اعمال شرایط اضافی در اتصالات شبکه، کدنویسی را مشکل می‌سازد. نمونه‌هایی از کاربرد مدل‌سازی معادله‌گرا در زمینه‌های گسترش بیماری‌های واگیردار و برخی از مطالعات در خصوص شبکه‌های تأمین‌کننده تجاری (Supply Networks) در تحقیقات وایدیا و همکاران (۲۰۱۵) و مامو و پورناچاندرا (۲۰۱۵) موجود است. ضمناً با توجه به این‌که معادله پخش، یک نسخه کلی از معادله دیفرانسیل گرما است، لذا نتایج و روش‌های اتخاذ شده در این پژوهش می‌تواند در مدل‌سازی انتقال گرما در شبکه، پخش آلودگی در شبکه رودخانه‌ها و مدل‌سازی پخش املاح در ریشه گیاهان مورد استفاده قرار بگیرد.

۲. مبانی نظری و روش‌ها

۲-۱. معادله پخش

نظریه ریاضی پخش در مواد همسانگرد (Isotropic)، بر این فرض استوار است که سرعت انتقال ماده منتشرشونده از یک سطح مقطع متناسب با گرادیان غلظت اندازه‌گیری شده‌است، که عبارت ریاضی آن به شرح زیر است (آدیسکات و لیدز-هریسون، ۲۰۰۵):

$$J = -D\frac{\partial C}{\partial x} \tag{۱}$$

$$W_{diffusion} = -AD\frac{\partial C}{\partial x} \tag{۲}$$

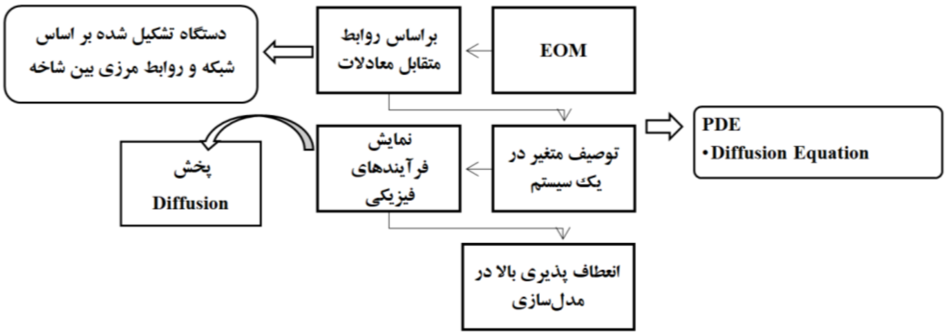
در معادله (۱) که قانون اول فیک (First Fick’s Law) است، J نرخ انتقال ماده در واحد سطح مقطع، C غلظت ماده در حال انتشار، x مختصات مکانی است و D ضریب پخش است. در برخی موارد ضریب پخش را در محلول‌های رقیق می‌توان به‌طور منطقی ثابت در نظر گرفت. علامت منفی در معادله (۱) به این دلیل است که پخش در خلاف جهت افزایش غلظت رخ می‌دهد. لازم به ذکر است زمانی که سطح مقطع A در معادله (۱) ضرب شود، بارگذاری ناشی از پدیده پخش حاصل می‌شود که در معادله (۲) آمده است.

طبق معادله پیوستگی جرم، هرگونه تغییر شار در یک حجم متناهی (Finite volume) منجر به تغییرات غلظت در زمان می‌شود، لذا معادله دیفرانسیل پخش در حالت یک‌بعدی مطابق معادله (۳) است. معادله (۳) قانون دوم فیک (Second Fick’s Law) است و بیانگر آن است که چگونه فرایند پخش، باعث تغییر غلظت نسبت به زمان می‌شود که به شرح زیر است (فیشر، ۱۹۷۹):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{۳}$$

در معادله (۳)، اگر مقادیر ضریب پخش و سطح مقطع نسبت به x متغیر باشد، می‌توان معادله را به‌شکل زیر نوشت:

$$\frac{\partial (AC)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(AD\frac{\partial C}{\partial x}\right) \tag{۴}$$



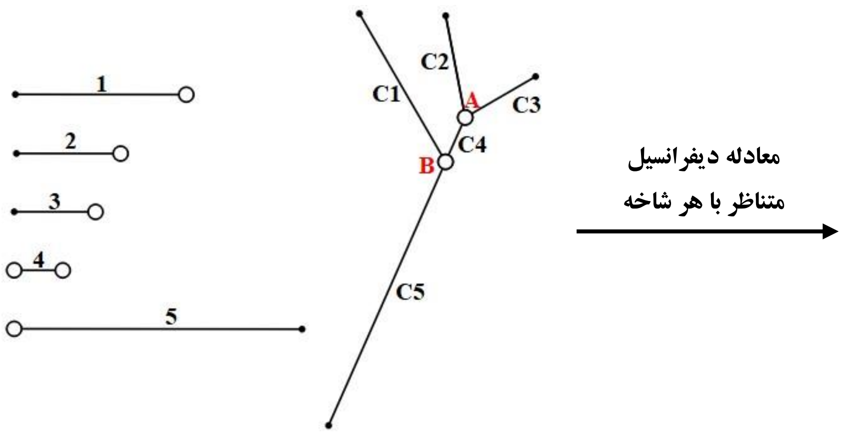
شکل ۱. مراحل مختلف روش EOM.

۲-۲. رویکرد معادله‌گرا (Equation-Oriented Modeling)

در این رویکرد ابتدا شبکه موردنظر به بخش‌های کوچک‌تر و سازنده شبکه تقسیم‌بندی شده، سپس با توجه به این موضوع که دامنه حل و ضرایب پخش و سطح مقطع برای هر شاخه متفاوت است، برای هر شاخه از شبکه یک معادله دیفرانسیل تعریف می‌شود. پس از تعیین شرط اولیه برای هر شاخه، شاخه‌های مختلف شبکه از طریق اعمال شرط مرزی که شامل پیوستگی غلظت و پیوستگی بارگذاری ناشی از پخش است، باهم در ارتباط قرار می‌گیرند. به‌عبارت‌دیگر معادلات دیفرانسیل حاصل‌شده از هر شاخه را تبدیل به یک دستگاه معادلات دیفرانسیل جزئی شده و سپس شرط مرزی با توجه به نوع اتصالات شاخه‌ها در شبکه نوشته می‌شود که توضیحات کامل این موضوع در بخش ۲-۳ آورده شده‌است. در پایان دستگاه معادله دیفرانسیل جزئی از طریق روش خطوط حل می‌شود که به‌طورکلی طی دو مرحله پیاده‌سازی می‌شود، در گام اول مشتقات مکانی به‌عنوان‌مثال C_x، C_{xx} با مقادیر جبری جایگزین می‌شود که پس از انجام این مرحله دستگاهی از معادلات دیفرانسیل معمولی تشکیل می‌شود که نیمه‌گسسته هستند. سپس در گام دوم، دستگاه معادله دیفرانسیل معمولی با روش دلخواه که در این تحقیق از رونگ-کوتا مرتبه ۴ استفاده شده‌است، نسبت به زمان انتگرال‌گیری می‌شود.

۲-۳. نحوه تشکیل دستگاه معادلات دیفرانسیل

در این بخش با توجه به‌شکل ۲ که یک مثال فرضی است، هر شاخه از شبکه دارای طول، سطح مقطع، ضریب پخش و پارامتر غلظت مربوط به خود است. به‌طور مثال C_1 بیانگر مقادیر غلظت در مکان‌ها و زمان‌های مختلف در شاخه ۱ است. همچنین محل تقاطع شاخه‌ها نیز با A و B مشخص شده‌است. لذا معادلات دیفرانسیل مربوط به هر شاخه در این شبکه ۵ شاخه‌ای، مطابق شکل (۲) است.



$$\begin{cases} \frac{\partial(A_1C_1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_1D_1\frac{\partial C_1}{\partial x}\right) \\ \frac{\partial(A_2C_2)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_2D_2\frac{\partial C_2}{\partial x}\right) \\ \frac{\partial(A_3C_3)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_3D_3\frac{\partial C_3}{\partial x}\right) \\ \frac{\partial(A_4C_4)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_4D_4\frac{\partial C_4}{\partial x}\right) \\ \frac{\partial(A_5C_5)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(A_5D_5\frac{\partial C_5}{\partial x}\right) \end{cases}$$

شکل ۲. شبکه ۵ شاخه‌ای فرضی جهت نمایش چگونگی تشکیل دستگاه و شرط مرزی در نقاط تقاطع.

در شبکه‌ای که تنها پدیده غالب در آن پخش است، در نقطه تقاطع شاخه‌ها باید دو شرط مرزی اعمال شود (هیکسون و همکاران، ۲۰۱۱):

یک) شرط مرزی نوع دوم (نویمان) که مجموع بارگذاری ناشی از پدیده پخش را در نقطه تقاطع برابر صفر کند.

دو) شرط مرزی نوع اول (دیریکله) که پیوستگی مقادیر غلظت را در نقطه تقاطع لحاظ کند.

با توجه به نکته ذکرشده در بالا، مجموع بارگذاری غلظت ناشی از پخش در نقطه تقاطع شاخه‌های ۲ و ۳ و ۴ یعنی نقطه A و همچنین برای گره B که شاخه‌های ۱و۴و۵ باهم تلاقی دارند، برابر صفر است. لذا شروط مرزی در نقطه A و B به شرح زیر است:

$$BC\ at\ A:\begin{cases}-A_2D_2\dfrac{\partial C_2}{\partial x}-A_3D_3\dfrac{\partial C_3}{\partial x}-A_4D_4\dfrac{\partial C_4}{\partial x}=0\\ C_2=C_3=C_4\end{cases}\qquad (۵)$$

$$BC\ at\ B:\begin{cases}-A_1D_1\dfrac{\partial C_1}{\partial x}-A_4D_4\dfrac{\partial C_4}{\partial x}-A_5D_5\dfrac{\partial C_5}{\partial x}=0\\ C_1=C_4=C_5\end{cases}\qquad (۶)$$

نکات ذکرشده در معادلات (۵) و (۶) مربوط به شرایط مرزی در گره‌هاست، در خصوص سرشاخه‌ها و نقاط انتهایی شاخه‌ها بنا بر فیزیک مسئله می‌توان مقدار بارگذاری ناشی از پخش یا مقادیر غلظت را تعریف کرد. اگر مقادیر غلظت اعمال شود، شرط مرزی نوع اول است که دیریکله (Dirichlet Boundary Condition) نام دارد و اگر از نوع بارگذاری ناشی از پخش باشد که مشتق غلظت در عبارت وجود دارد، شرط مرزی نوع دوم است که شرط مرزی نویمان (Neumann Boundary Condition) است (پولیانین و زایتسف، ۲۰۰۳). در این پژوهش از هر دو شرط مرزی دیریکله و نویمان برای سرشاخه‌های شبکه استفاده شده‌است اما برای گره انتهایی شاخه‌های پایانی شبکه، از شرط مرزی نویمان استفاده شده است.

برای تعمیم روابط موجود در شکل ۲ و معادلات (۵) و (۶) به شبکه N شاخه‌ای باید معادلات به‌صورت ماتریسی نوشته شود و دستگاه معادلات تشکیل شود، که به‌شکل زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}A_1C_1\\ \vdots\\ \vdots\\ \vdots\\ A_NC_N\end{bmatrix}_{1\times N}=\frac{\partial}{\partial x}\begin{bmatrix}A_1D_1\,\partial C_1/\partial x\\ \vdots\\ \vdots\\ \vdots\\ A_ND_N\,\partial C_N/\partial x\end{bmatrix}_{1\times N}\qquad (۷)$$

همچنین باید دستگاه دیگری برای شروط مرزی تشکیل داده شود که با توجه به نوع اتصالات شاخه‌ها به یکدیگر روابط متفاوت است.

۲-۴. تبدیل دامنه معادلات دستگاه دیفرانسیل به بازه [۰،۱]

در هر شبکه‌ای به‌طور مثال شبکه ریشه گیاهان، شبکه رودخانه، شبکه عصبی بدن یا شبکه میکروکانال، ممکن است طول شاخه‌ها باهم برابر نباشند، لذا برای حل این شبکه‌ها به‌صورت دستگاه معادله دیفرانسیل باید همه معادلات در راستای x بی‌بعد شود. به‌عبارت‌دیگر در معادله (۷) مشکل اصلی در حل دستگاه این است که طول شاخه‌ها باهم برابر نیست و دستگاه قابل‌حل نیست، لذا جهت بی‌بعد کردن معادلات لازم است یک متغیر x^* تعریف شود، که از رابطه $x^*=x/L$ به‌دست می‌آید. در این رابطه L طول واقعی شاخه‌هاست. در نتیجه تمامی شاخه‌ها در بازه ۰ تا ۱ حل می‌شوند تا اثر طول‌های متفاوت شاخه ها از بین برود. با توجه به نکات گفته‌شده معادله (۷) برای حل به‌صورت دستگاه باید به‌شکل معادله (۸) در بیاید که به شرح زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}A_1C_1\\ \vdots\\ \vdots\\ \vdots\\ A_NC_N\end{bmatrix}_{1\times N}=\frac{\partial}{\partial x^*}\begin{bmatrix}\dfrac{A_1D_1}{L_1^2}\partial C_1/\partial x^*\\ \vdots\\ \vdots\\ \vdots\\ \dfrac{A_ND_N}{L_N^2}\partial C_N/\partial x^*\end{bmatrix}_{1\times N}\qquad (۸)$$

۲-۵. روش خطوط (Method of Lines)

یکی از کارآمدترین روش‌ها جهت حل دستگاه معادله دیفرانسیل جزئی مطابق معادله (۸) استفاده از روش خطوط است که بسیاری از نرم‌افزارها به این روش معادله

دیفرانسیل را حل می‌کنند. ایده اصلی روش خطوط، جایگزینی مشتقات مکانی (Spatial Derivatives) در معادله دیفرانسیل با تقریب‌های جبری (Algebraic Approximations) است. بنابراین تنها متغیر مقدار اولیه که معمولاً زمان است، در یک مسئله فیزیکی باقی می‌ماند. به‌عبارت‌دیگر، با تنها یک متغیر مستقل باقی‌مانده، دستگاهی از معادلات دیفرانسیل معمولی (Ordinary Differential Equation) به‌دست می‌آید که به معادله دیفرانسیل جزئی اصلی تقریب دارند. لذا چالش اصلی، فرمول‌بندی کردن دستگاهی از معادلات دیفرانسیل معمولی است که پس از آن هر الگوریتم انتگرال‌گیری را می‌توان بر روی آنها اعمال کرد تا یک جواب عددی تقریبی برای معادلات دیفرانسیل جزئی محاسبه شود (شیسر و گریفیث، ۲۰۰۹). اگر یک معادله دیفرانسیل جزئی به فرم زیر باشد، روش خطوط به شرح زیر است:

$$\mathbf{C}_t = \mathbf{f}(\mathbf{C}), \quad x_L < x < x_R \ , \quad t > 0 \qquad (۹)$$

در معادله (۹):

$\mathbf{C}_t$: مشتق ماتریس متغیرهای وابسته (غلظت یا دما) برحسب زمان است.

C: ماتریس متغیرهای وابسته

x مکان در جهت افقی محور کارتزین (یک‌بعدی)

f: تابعی دلخواه از متغیرهای وابسته یعنی غلظت، به‌عبارت‌دیگر جمله‌های تشکیل‌دهنده معادله دیفرانسیل جزئی در طرف چپ تساوی یعنی $\mathbf{f}\,(x, t, \mathbf{C}, \mathbf{C}_x, \mathbf{C}_{xx}, \ldots)$ اگر فرض شود تابع **f** جمله پخش باشد، در مرحله اول باید گسسته‌سازی در مکان یعنی x صورت گیرد که به‌شکل زیر است:

$$\mathbf{f} = \mathbf{D} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2} \approx \mathbf{D} \cdot \frac{\mathbf{C}_{i+1} - 2\mathbf{C}_i + \mathbf{C}_{i-1}}{\Delta x^2} \qquad (۱۰)$$

i شاخصی است که موقعیت را در امتداد یک شبکه در x تعیین می‌کند و Δx گام مکانی در طول شبکه است. همچنین **D** ماتریس ضرایب پخش است. بنابراین تقریب معادله (۱۰) به‌شکل زیر می‌شود:

$$\frac{d\mathbf{C}_i}{dt} = \mathbf{D} \cdot \frac{\mathbf{C}_{i+1} - 2\mathbf{C}_i + \mathbf{C}_{i-1}}{\Delta x^2} \ , 1 \le i \le M \qquad (۱۱)$$

معادله فوق یک دستگاه معادله دیفرانسیل معمولی است زیرا در این دستگاه یک متغیر مستقل وجود دارد، که آن هم t است. در روش خطوط ابتدا مشتقات مکانی که در رابطه (۱۰)، $\frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2}$ است با مقادیر جبری جایگزین می‌شود به‌طوری‌که دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی به معادله دیفرانسیل جزئی اصلی تقریب پیدا می‌کند. در گام بعدی باید شرط اولیه و شرط مرزی هر شاخه اعمال شود و پس از آن انتگرال‌گیری معادلات دیفرانسیل معمولی نسبت به t صورت‌می‌گیرد. به‌منظور انتگرال‌گیری معادلات دیفرانسیل معمولی روش‌های بسیار زیادی وجود دارد که یکی از دقیق‌ترین روش‌ها، روش رونگ-کوتا مرتبه ۴ است که در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته‌است و جزئیات آن در تحقیق رومئو (۲۰۲۰) موجود است.

۲-۶. مقایسه نتایج مدل معادله‌گرا با یک مدل عددی

جهت درستی‌سنجی نتایج مدل معادله‌گرا، یک مدل عددی دیگر برای شبکه شماره ۳ اجرا شد و نیم‌رخ غلظت آلودگی در مسیر ۱-۲-۹-۵-۳ در زمان‌های مختلف از مدل‌سازی با یکدیگر مقایسه شدند. در روش‌های عددی پیشین برخلاف روش معادله‌گرا، یک معادله دیفرانسیل در کل شبکه گسسته شد و یک دستگاه معادله دیفرانسیل واحد برای کل شبکه ایجاد شد و همچنین برای گسسته‌سازی مشتقات مکانی از روش تفاضل متناهی پس رو و برای گسسته‌سازی در زمان نیز از طرح ضمنی کامل استفاده شد. سپس ۳ پارامتر خطای آماری بین نتایج روش معادله‌گرا و روش عددی دیگر محاسبه شد که عبارت‌اند از:

- ضریب همبستگی (R^2): این پارامتر بیان دارد که نیم‌رخ غلظت آلودگی در دو روش تا چه میزانی بر هم منطبق هستند و هرچه مقدار ضریب همبستگی به ۱ نزدیک‌تر باشد، انطباق مقادیر غلظت در دو روش بیشتر است.

- خطای جذر میانگین مربعات (RMSE): یکی از پارامترهای پرکاربرد برای اندازه‌گیری اختلاف بین مقادیر

مدل‌سازی شده با یک مدل دیگر یا مقدار واقعی است. مقدار این پارامتر هرچه به صفر نزدیک‌تر باشد، بیانگر خطای کمتر بین دو روش مدل‌سازی است.

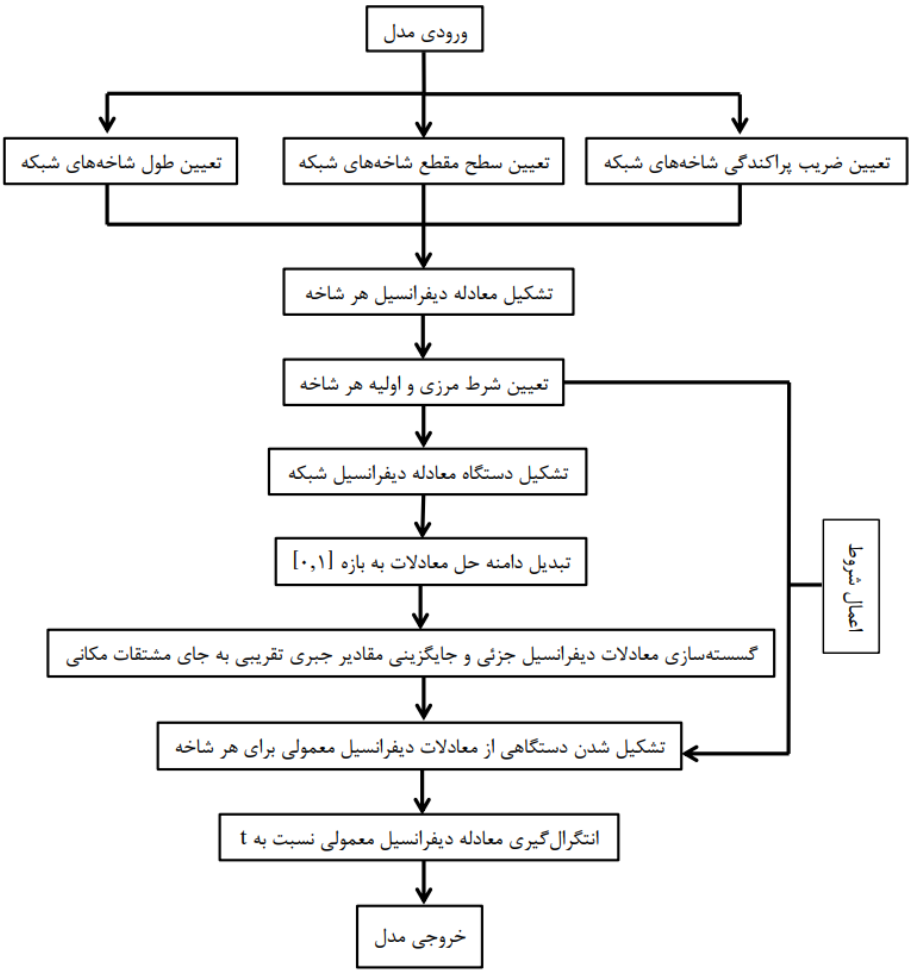
– میانگین خطای مطلق (MAE): این پارامتر خطا نیز مانند RMSE، بیانگر میزان انطباق و نزدیکی مقادیر غلظت آلودگی در دو روش مدل‌سازی است که مقدار بهینه این پارامتر نیز صفر است.

روند کلی رویکرد حل معادله‌گرا در شبکه در فلوچارت شکل ۳ آمده است.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. کلیات مدل‌ها

برای حل معادله پخش در شبکه با استفاده از رویکرد معادله‌گرا، سه شبکه مختلف در نظر گرفته شد. مدل شماره ۱ و ۳ ساختار درختی و مدل شماره ۲ ساختار درختی-حلقه‌ای دارند. شرط مرزی ابتدای سرشاخه‌ها، به‌صورت بارگذاری غلظت یا مقادیر غلظت تعریف شده‌است ونسبت به زمان متغیر هستند. مقادیر سطح مقطع و ضریب پخش در طول هر شاخه‌ها نسبت به x ثابت است، اما مقادیر آن برای هر شاخه متفاوت است. همچنین در نقاط پایانی شبکه شرط مرزی نویمان اعمال و به‌منظور حل دستگاه معادله دیفرانسیل حاصل‌شده از شاخه‌های مختلف شبکه، از روش خطوط استفاده شده‌است. برای نمایش نیم‌رخ مکانی غلظت، به هر گره از شبکه شماره‌ای اختصاص داده شده‌است و خروجی‌های مدل به‌صورت یک مسیر متشکل از شماره گره‌ها آورده شده‌است. توضیحات کلی در خصوص شبکه‌های استفاده‌شده در این پژوهش، در جدول (۱) آمده است.



شکل ۳. فلوچارت کلی روش مدل‌سازی معادله‌گرا در شبکه.

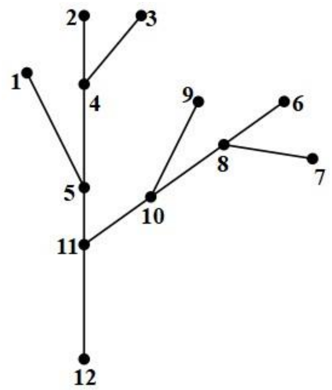
جدول ۱. توضیحات کلی در مورد هدف و نوع شبکه‌های مدل‌سازی شده.

عنوان مثال	نوع شبکه	توضیحات
مدل ۱: مدل‌سازی انتقال جرم (املاح) توسط پدیده پخش در ریشه گیاهان	درختی ۱۱ شاخه‌ای	یک شبکه درختی است که دارای ۱۱ شاخه است. در این شبکه در سرشاخه‌های ۱ و ۹، ۲و٦ ، ۳و۷ بارگذاری غلظت یکسان در نظر گرفته شده‌است. این شبکه درختی از تحقیق (گولیک و اسکات، ۲۰۱۱) الهام گرفته شده‌است که به بررسی اشکال و فرم‌های مختلف ریشه‌های گیاهان پرداخته‌است.
مدل ۲: مدل‌سازی انتقال گرما در شبکه	درختی-حلقه‌ای ۱۰ شاخه‌ای	این شبکه یکی از شبکه‌های رایج برای طراحی سیستم‌های خنک کننده است که از تحقیق (یو و همکاران، ۲۰۱۲) الهام گرفته شده است. هدف از آوردن این شبکه این بود که مدل جهت مدل‌سازی انتقال گرما برای یک شبکه حلقه‌ای اجرا شود چون اساساً معادله دیفرانسیل انتقال گرما و معادله دیفرانسیل پخش یکسان هستند. این شبکه دارای ۱۰ شاخه هست و مقادیر دما مستقیماً در ابتدای شاخه اول به‌عنوان شرط مرزی دیریکله اعمال شده‌است.
مدل ۳: مدل‌سازی انتقال جرم (آلودگی) توسط پدیده پخش در شبکه رودخانه	درختی ۱۵ شاخه‌ای	این شبکه درختی دارای ۱۵ شاخه است. شار آلودگی از ابتدای شاخه ۱ اعمال شده‌است و قرار است توزیع غلظت آلودگی در تمامی شاخه به‌عنوان خروجی مدل حاصل شود. این شبکه درختی از تحقیق (الحاربی و همکاران، ۲۰۰۳) الهام گرفته شده‌است.

در قسمت نتایج برای مدل شماره ۳، از یک روش عددی دیگر جهت درستی‌سنجی نتایج مدل‌سازی معادله‌گرا استفاده شده‌است. در روش عددی برخلاف روش معادله گرا، معادله پخش در کل شبکه گسسته سازی شد و دستگاه معادلات دیفرانسیل حاصل‌شده به‌صورت یک دستگاه واحد برای کل شبکه تشکیل شد و در نقاط اتصال شاخه کدنویسی را طولانی‌تر کرد و از طرح ضمنی کامل (Fully implicit) برای گسسته‌سازی زمان و روش تفاضل پس‌رو برای گسسته‌سازی مکانی استفاده شد. در ادامه پارامترهای خطا شامل RMSE و MAE محاسبه شد و همچنین میزان هم‌روند بودن دو مدل‌سازی با پارامتر R^2 مشخص شد که در بخش (۳-۴-۱) جدول مربوط به نتایج درستی‌سنجی روش عددی کلاسیک و روش معادله‌گرا آورده شده‌است.

۳-۲. نتایج مدل ۱

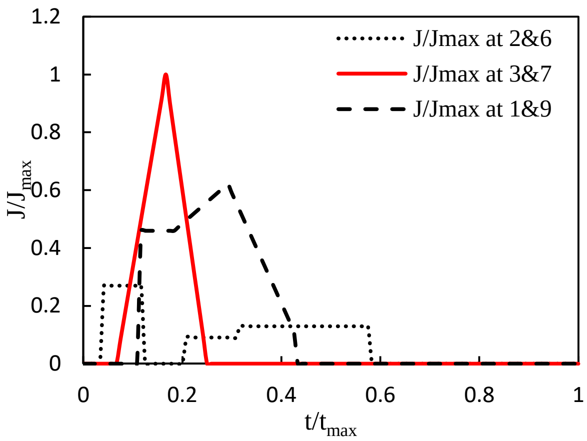
در مثال اول، شبکه ۱۱ شاخه‌ای با ساختار درختی مطابق شکل ۴ در نظر گرفته شده‌است. مشخصات طول و سطح مقطع و ضریب پخش هر شاخه از شبکه مطابق جدول ۲ آورده شده‌است. زمان کل مدل‌سازی در این شبکه ۱۲۰ ثانیه است. برای نام‌گذاری گره‌ها از اعداد استفاده شده‌است و خروجی‌های مدل‌سازی به‌صورت نیم‌رخ تغییرات غلظت در طول مسیر آورده شده‌است. همچنین در نقاط ۹،۷،۶،۳،۲،۱ شار غلظت اعمال شده‌است که در زمان متغیر است و در شکل ۵ آورده شده‌است.



شکل ٤. شبکه درختی شماره ۱.

جدول ۲. مشخصات شاخه‌های مختلف مدل شماره ۱.

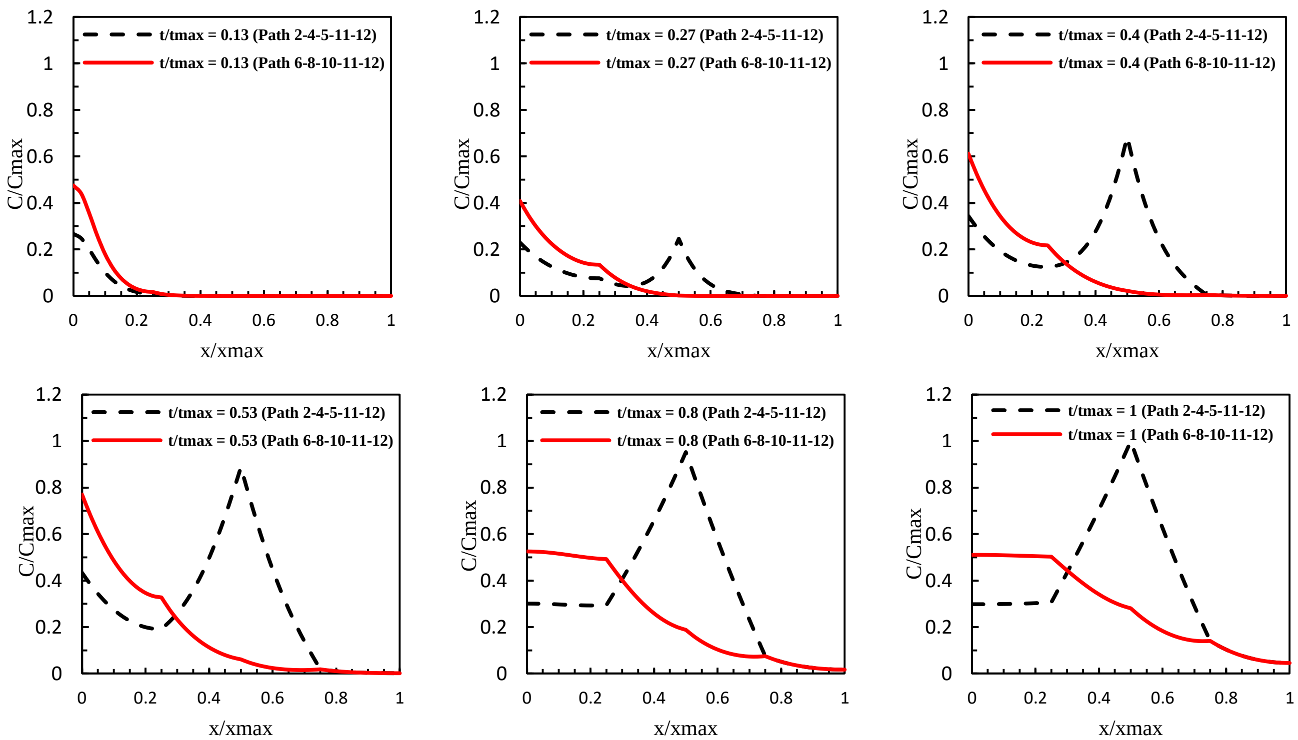
شماره شاخه	طول شاخه (mm)	سطح مقطع (mm^2)	ضریب پراکندگی (cm/s)
۱-۵، ۱-۹	۱۰	۰/۰۳	۰/۰۲
۲-٤، ٤-٥، ١١-٥، ١٢-١١	۳۰	۰/۱۲۱	۰/۰۸۵
٦-٨، ٨-١٠، ١٠-١١	۳۰	۰/۰٦٨	۰/۰۸۵
٤-٣، ٨-٧	۱۰	۰/۰۳	۰/۰۲



شکل ۵. شار غلظت اعمال‌شده در گره‌های مختلف مدل شماره ۱.

۳-۲-۱. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۲-۴-۵-۱۱-۱۲ و ۶-۸-۱۰-۱۱-۱۲

نیم‌رخ مکانی غلظت در ۶ زمان مختلف برای مسیرهای ۲-۴-۵-۱۱-۱۲ و ۶-۸-۱۰-۱۱-۱۲ در شکل ۶ آمده‌است. لذا نتایج مدل‌سازی برای این دو مسیر مطابق شکل (۶) است.



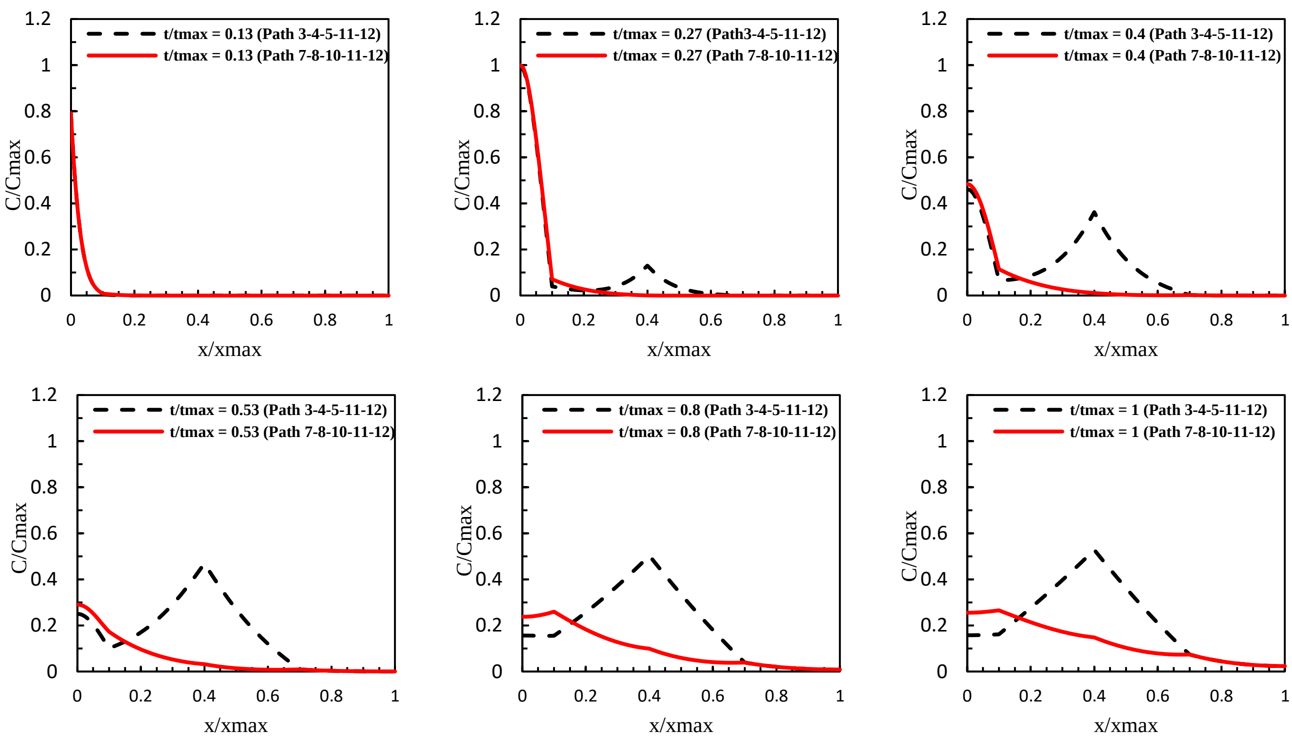
شکل ٦. نیم‌رخ غلظت در مسیر ٢-٤-٥-١١-١٢ و ٦-٨-١٠-١١-١٢.

طبق نمودار بارگذاری که در شکل ۵ آورده شده‌است، بارگذاری گره ۲ و ۶ یکسان است اما به‌دلیل سطح مقطع کوچک‌تر انتظار می‌رود تأثیر شار غلظت در گره ۶ بیشتر باشد که در خروجی مدل هم این اثر دیده‌می‌شود و میزان غلظت در ابتدای زمان مدل‌سازی برای گره ۶ بیشتر است. اما به‌تدریج با گذشت زمان، مقادیر غلظت در گره ۵ افزایش می‌یابد که دلیل آن اعمال شرط مرزی است که در انتهای شبکه، شار ناشی از پخش را معادل صفر می‌کند و باعث می‌شود انتهای شبکه موردنظر منزوی شود، لذا با توجه به این موضوع که پدیده پخش در هر دو جهت محور x در حال رخ دادن است، مقادیر غلظت که به گره ۱۲ رسیده‌اند، مجدد پس می‌زند و در نقطه ۵ موجب افزایش غلظت می‌شود و این عمل آن‌قدر تکرار می‌شود که کل سیستم به یک غلظت ثابت رسیده و گرادیان غلظت از بین رفته باشد.

۳-۲-۲. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۷-۸-۱۰-۱۱-۱۲ و ۳-۴-۵-۱۱-۱۲

نیم‌رخ مکانی غلظت در ۶ زمان مختلف برای مسیرهای ۷-۸-۱۰-۱۱-۱۲ و ۳-۴-۵-۱۱-۱۲ در شکل ۷ آمده‌است. لذا نتایج مدل‌سازی برای این دو مسیر مطابق شکل (۷) است.

طبق شکل ۵، بارگذاری غلظت در گره ۳ و ۷ یکسان است و مطابق جدول ۱، طول، سطح مقطع و ضریب پخش برای شاخه ۳-۴ و ۷-۸ برابر است، لذا در ابتدای زمان مدل‌سازی نیم‌رخ مکانی غلظت برای این مسیر منطبق بر هم است و بیانگر عملکرد صحیح مدل است. اما در زمان ۰/۲۷ نشانه‌ای از اختلاف نیم‌رخ مکانی غلظت در این دو مسیر نمایان می‌شود، که دلیل این اختلاف در بخش قبلی توضیح داده شد و منشأ آن، پس‌زدن غلظت بر اثر شرط مرزی نویمان در گره ۱۲ است و از سوی دیگر غلظت از سرشاخه‌های ۱و۲ و ۳ شروع به حرکت کرده و نهایتاً در نقطه ۵ به یکدیگر می‌پیوندند و باعث افزایش غلظت در آن نقطه می‌شود. با گذشت زمان به‌مرور غلظت در مسیر ۷-۸-۱۰-۱۲-۱۱ به‌حالت پایا نزدیک می‌شود و مقادیر غلظت روند کاهشی دارد.



شکل ۷. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۳-۴-۵-۱۱-۱۲ و ۷-۸-۱۰-۱۱-۱۲.

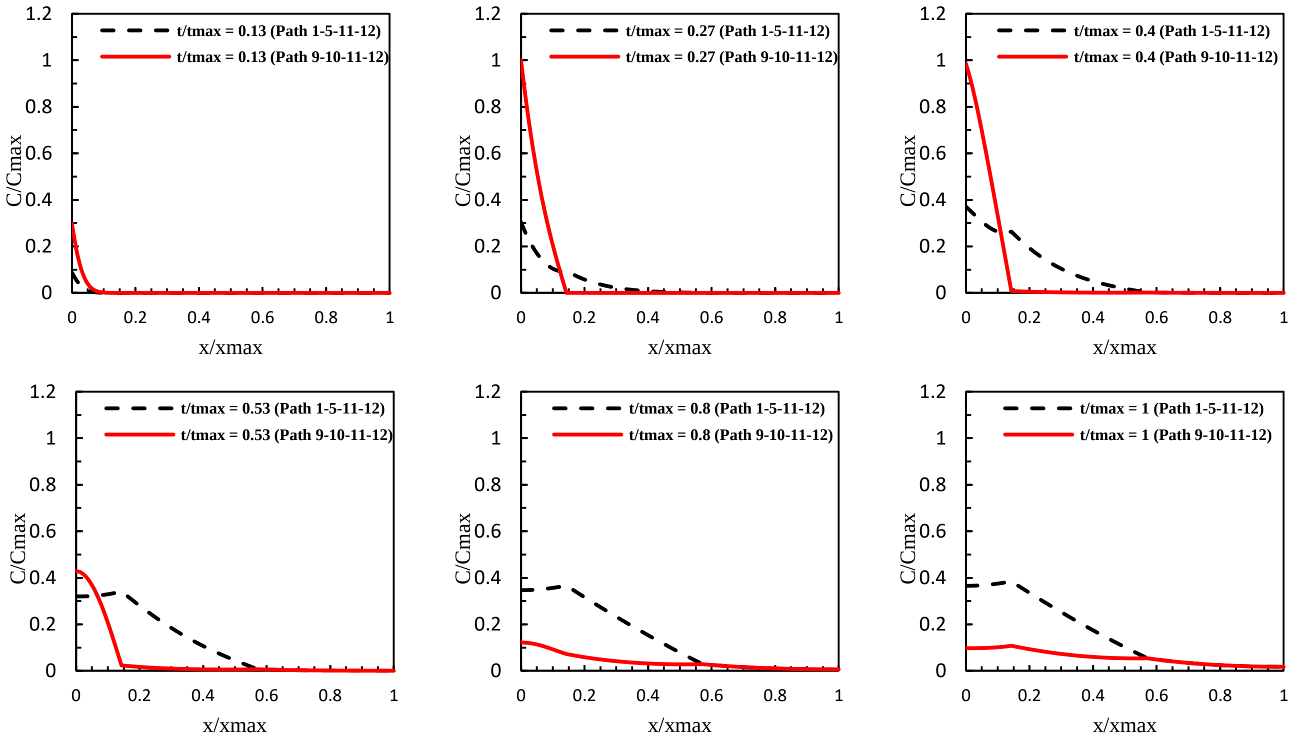
۳-۲-۳. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۱-۵-۱۱-۱۲ و ۹-۱۰-۱۱-۱۲

نیم‌رخ مکانی غلظت در ۶ زمان مختلف برای مسیرهای ۱-۵-۱۱-۱۲ و ۹-۱۰-۱۱-۱۲ در شکل ۸ آمده است و نتایج مدل‌سازی برای این دو مسیر مطابق شکل (۸) است.

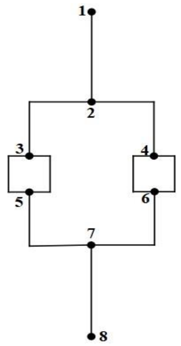
با توجه به الگوی بارگذاری غلظت برای گره ۱ و ۹ مطابق شکل ۵، بارگذاری هر دو یکسان است اما شاخه ۹ به‌دلیل کوچک‌تر بودن سطح مقطعش تحت‌تأثیر افزایش غلظت بیشتری قرار می‌گیرد که در شکل ۷ این موضوع مشخص است. اما در ادامه به‌دلیل پس‌زدن غلظت، انتهای شاخه ۱-۵ در گره ۵ تحت‌تأثیر قرار گرفته و غلظت در این نقطه به شدت بالا می‌رود. اما با گذشت زمان مقادیر غلظت در شاخه ۹-۱۰-۱۱-۱۲ به‌حالت پایدار می‌رسد و گرادیان غلظت در مسیرهای ذکرشده اما باید در نظر گرفت حالت ماندگار همیشه در زمان بی‌نهایت رخ می‌دهد.

۳-۳. نتایج مدل ۲

در مثال دوم، یک شبکه حلقه‌ای-درختی متشکل از ۱۰ شاخه مطابق شکل ۹ در نظر گرفته شده‌است. طول، سطح مقطع و ضریب پخش برای شاخه از شبکه مطابق جدول ۳ آورده شده‌است. زمان کل مدل‌سازی انتقال گرما در این شبکه ۱۲۰ ثانیه است. در این مثال مقادیر دما به‌عنوان شرط مرزی دیریکله در گره ۱ اعمال شده‌است، که در شکل ۱۰ آورده شده‌است.



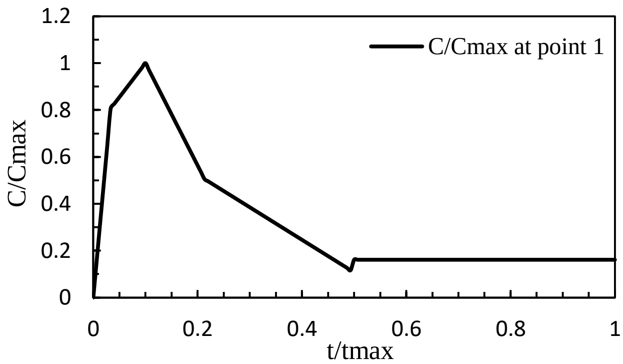
شکل ۸. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۱-۵-۱۱-۱۲ و ۹-۱۰-۱۱-۱۲.



شکل ۹. شبکه حلقه‌ای شماره ۲.

جدول ۳. مشخصات شاخه‌های مختلف مدل شماره ۲.

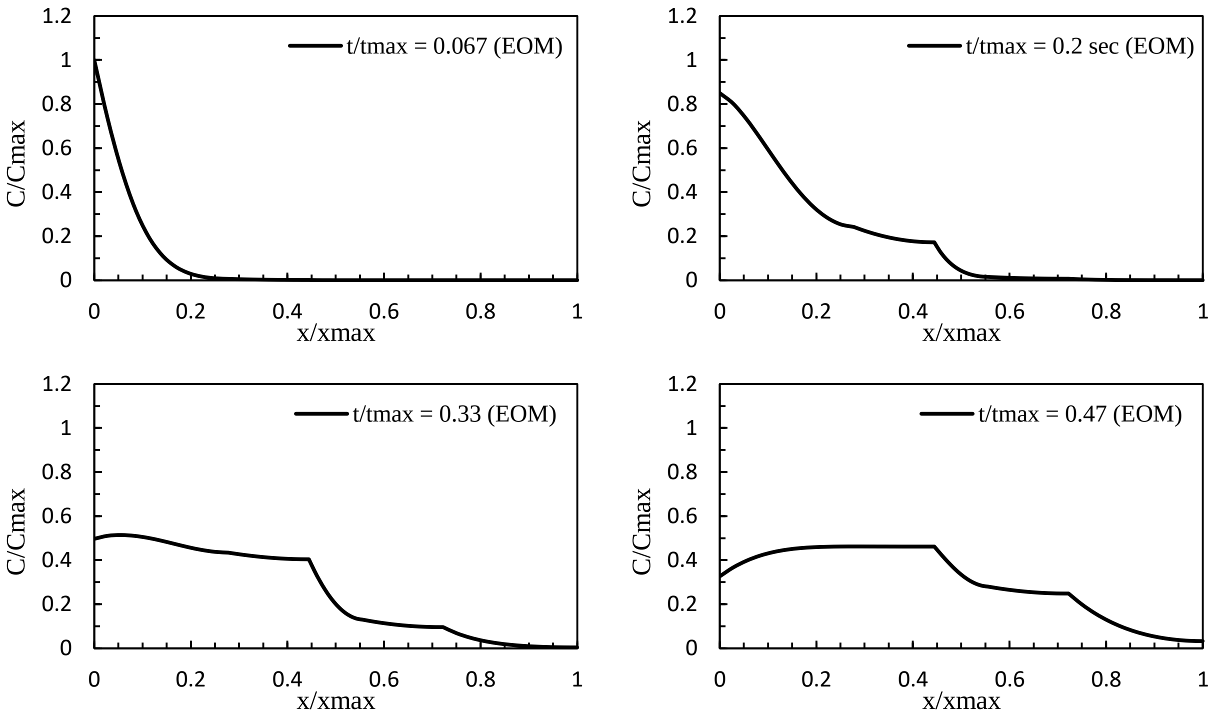
شماره شاخه	طول شاخه (mm)	سطح مقطع(mm^2)	ضریب پراکندگی (cm/s)
۱–۲	۲۵	۰/۱۳۷	۰/۰۶۱۲
۳–۲، ٤–۲، ۷–۵، ۷–٦	۱۵	۰/۰٦۸٤	۰/۲۸۹
۵–۳، ٦–٤	۱۰	۰/۰۳۵۷	۰/۰۱۹۳

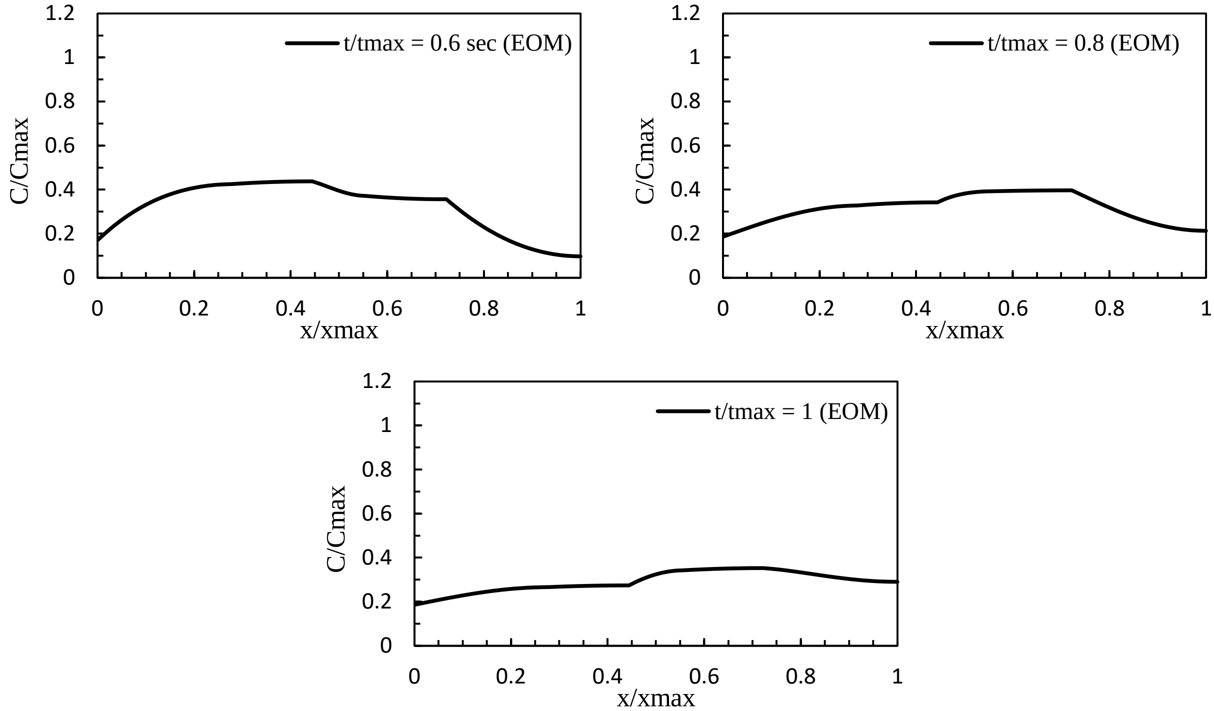


شکل ۱۰. مقادیر غلظت در گره ۱ شبکه شماره ۲.

۳-۳-۱. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۱-۲-۳-۵-۷-۸

نیم‌رخ مکانی غلظت در ۷ زمان مختلف برای مسیرهای ۱–۲–۳–۵–۷–۸ در شکل ۱۱ آمده است. لذا نتایج مدل‌سازی برای این مسیر مطابق شکل (۱۱) است.



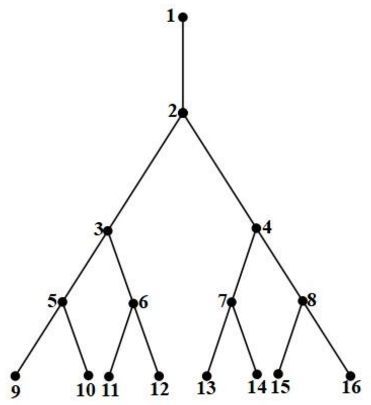


شکل ۱۱. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۱–۲–۳–۵–۷–۸.

همان‌طور که ذکر شد مقادیر دما در گره ۱ اعمال شده‌است، لذا شرط مرزی از نوع دیریکله است. مقادیر غلظت در گره ۱ در گراف‌های خروجی کاملاً با مقادیر اعمال‌شده مطابقت دارند. طبق شکل ۹ غلظت در گره ۱ ابتدا روند صعودی دارد و پس از آن روند نزولی دارد و سپس ثابت می‌شود که همین روند در شکل‌های خروجی نیز قابل مشاهده‌است. در ابتدای مدل‌سازی، دما به‌شدت در شاخه اول یعنی ۱–۲ بالا می‌رود، سپس با گذشت زمان‌بر اثر انتقال گرما در شبکه، دما در طول مسیر افزایش‌یافته و همان‌طور که از نیم‌رخ دما در طی زمان‌های مختلف مشخص است، روند کلی تغییرات دما در طول شبکه به‌سمت حالت‌پایا می‌رود. با توجه به این موضوع که زیرشاخه‌ها دارای ضریب پخش و سطح مقطع یکسان هستند لذا نتایج مسیرهای مختلف منتهی به انتهای شبکه همه یکسان است، بنابراین نیم‌رخ غلظت در مسیر ۱–۲–۳–۵–۷–۸ می‌تواند بیانگر نتایج باقی مسیرها نیز باشد.

۴-۳. نتایج شبکه شماره ۳

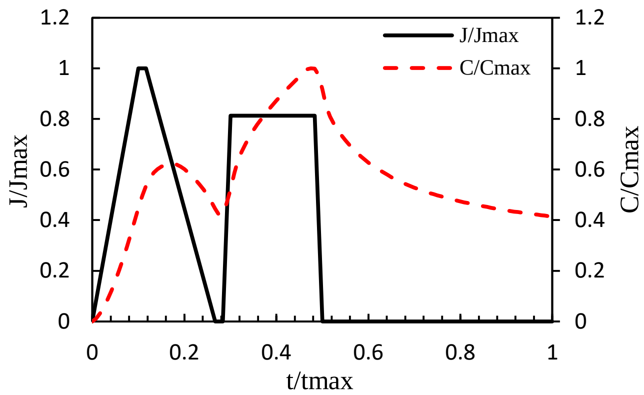
در مثال سوم، شبکه‌ای با ساختار درختی شامل ۱۵ شاخه به‌صورت شکل ۱۲ در نظر گرفته شده‌است. طول، سطح مقطع و ضریب پخش شاخه‌های مختلف مطابق جدول ۴ است. همان‌طور که از مقادیر جدول ۴ مشخص است، این شبکه قرینه است. مدت زمان مدل‌سازی آلودگی در این شبکه ۶۰ ساعت است. خروجی مدل‌سازی پخش آلودگی در این شبکه برای مسیر ۱–۲–۳–۵–۹ در شکل ۱۴ قابل‌مشاهده است. لازم به ذکر است که در گره ۱ شار آلودگی به‌صورت تابع مثلثی و پله‌ای تعریف شده‌است و تغییرات غلظت آلودگی متناظر با آن شار، نیز در شکل ۱۳ آورده شده‌است.



شکل ۱۲. شبکه درختی شماره ۳.

جدول ٤. مشخصات شاخه‌های مختلف مدل شماره ۳.

شماره شاخه	طول شاخه (m)	سطح مقطع(m^2)	ضریب پراکندگی (cm/s)
١–٢	٢٠٠٠	٠/١٢٥	٣١
٣–٢ و ٢–٤	١٠٠٠	٠/٠٦٢٥	٢٧/٩
٣–٣،٥–٤،٦–٤،٧–٨	٧٥٠	٠/٠٣١٢٥	٢٣/٤٥
٩–٥، ١٠–٥، ١١–٦، ١٢–٦، ١٣–٧، ١٤–٧، ١٥–٨، ١٦–٨	٥٠٠	٠/٠١٥٦٢٥	١٩/٨٤



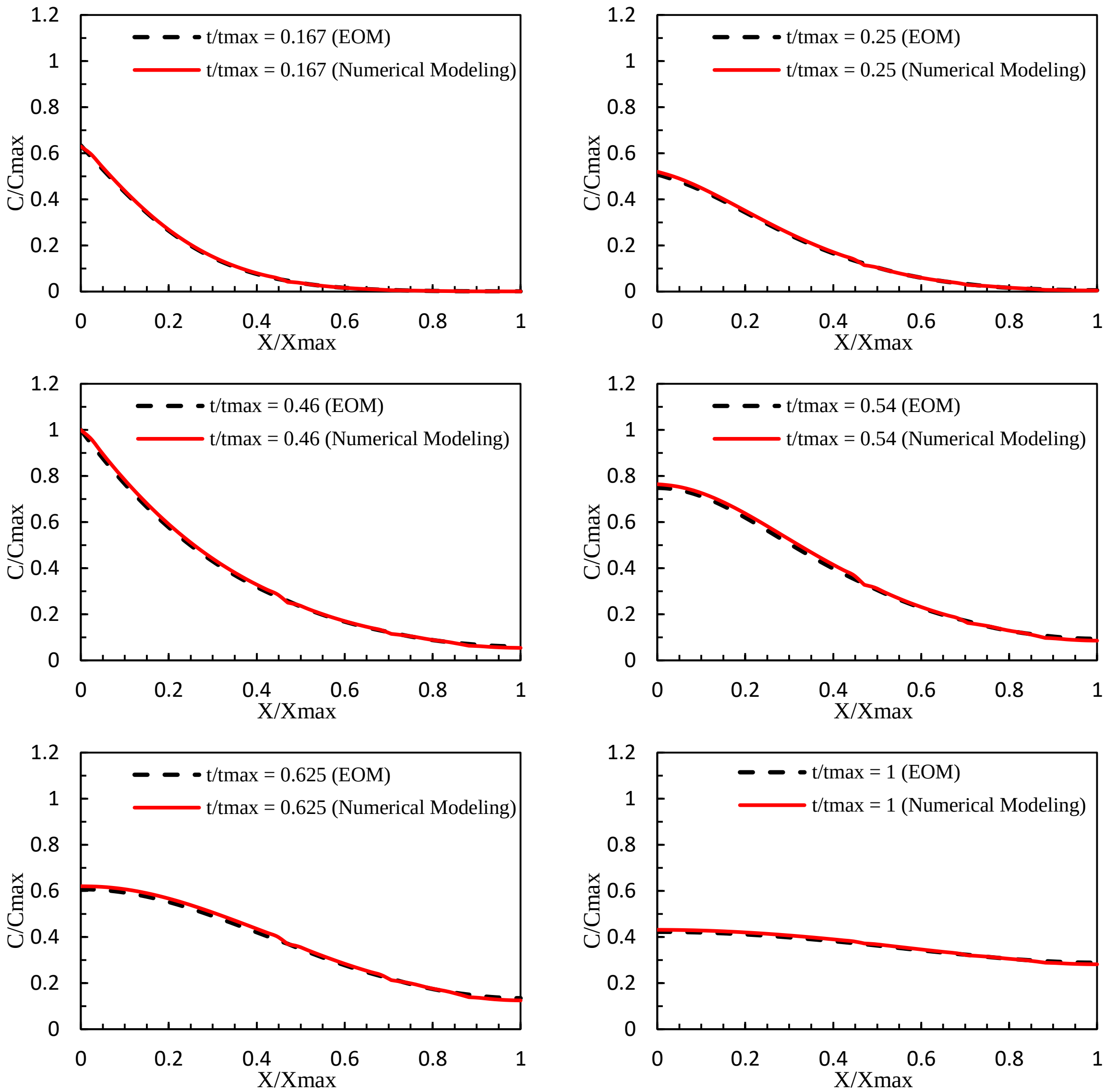
شکل ۱۳. شار غلظت و بارگذاری متناظر آن در گره ۱ برای مدل شماره ۲.

۳-۴-۱. نیم‌رخ مکانی غلظت مسیر ۱-۲-۳-۵-۹

ازآنجایی‌که ضریب پخش و سطح مقطع در زیرشاخه‌ها باهم برابر است لذا می‌توان برای نمایش خروجی مدل سازی این شبکه یکی از مسیرهای منتهی به انتهای شبکه را انتخاب کرد و نتایج حاصل از مدل‌سازی هم‌بر این موضوع صحه گذاشته و نتایج مسیرهای مختلف کاملاً یکسان به‌دست آمده‌است. در شکل ۱۴ خطوط مشکی منقطع بیانگر نتایج مدل معادله‌گرا و خطوط قرمز بیانگر نتایج یک مدل عددی دیگر است که در زمان‌های مختلف برای مقایسه نتایج ترسیم‌شده‌اند. در شکل ۱۴ توزیع مکانی غلظت در مسیر ۱-۲-۳-۵-۹ آورده شده‌است.

مطابق شکل ۱۳ شار آلودگی نسبت به زمان متغیر بوده و مدل‌سازی پخش آلودگی در شبکه در شرایط ناپایدار صورت گرفته است. اما با توجه به‌شکل ۱۴ ، در زمان ۰/۱۶۷ غلظت در شاخه (۱-۲) به‌شدت بالا رفته و پس از آن به‌مرور زمان کاهش‌یافته و دوباره در زمان ۰/۴۶ به‌واسطه شار غلظت که به‌صورت پله‌ای اعمال شده‌است، مقادیر غلظت در شاخه‌ها به‌خصوص شاخه (۱-۲) افزایش‌یافته و به بیشینه مقدار خود می‌رسد. پس از اتمام شار ورودی به گره ۱ غلظت آلودگی در کل شبکه به مقدار ثابت میل می‌کند که حدود ۰/۴ مقدار بیشینه غلظت آلودگی است که این مقدار در زمان ۱ مشخص است.

در این مثال همان‌طور که پیش‌تر ذکر شد از یک روش عددی دیگر جهت درستی‌سنجی نتایج مدل‌سازی معادله گرا استفاده شده‌است که در جدول (۵)، مقادیر پارامترهای خطا بین دو مدل‌سازی ارائه شده است.



شکل ۱٤. نیم‌رخ مکانی غلظت در مسیر ۱-۲-۳-۵-۹ برای شبکه شماره ۱.

جدول ۵. مقادیر پارامترهای خطا بین دو مدل‌سازی در مسیر ۱-۲-۳-۵-۹ برای مدل شماره ۳.

t/t_{max}	ضریب همبستگی (R^2)	خطای RMSE	خطای MAE
۰/۱٦	۱	۰/۰۰۳۷	۰/۰۰۲٦
۰/۲۵	۰/۹۹	۰/۰۰٦۱	۰/۰۰٤٦
۰/٤٦	۰/۹۹	۰/۰۱۰۲	۰/۰۰۸۳
۰/٥٤	۰/۹۹	۰/۰۱۲٥	۰/۰۱۰۸
۰/٦۲٥	۰/۹۹	۰/۰۱۱٤	۰/۰۱۰٤
۱	۰/۹۹	۰/۰۰٦۷	۰/۰۰٦۱

با توجه به جدول ۵ مقادیر ضریب همبستگی برای زمان های مختلف، تقریباً معادل ۱ به‌دست آمده‌است که مقدار بهینه این پارامتر است و بیانگر این است که روند نیم‌رخ غلظت آلودگی در هر دو مدل‌سازی کاملاً بر هم منطبق است. خطای RMSE و MAE مطابق جدول ۵، در تمامی زمان‌ها با تقریب مناسبی برابر صفر به‌دست آمده‌است که بیانگر این است که اختلاف مقادیر غلظت آلودگی برآورد شده توسط مدل معادله‌گرا و روش عددی

کلاسیک ناچیز است. با توجه به شکل ۱۴ که در آن مقایسه نتایج مدل‌سازی معادله‌گرا و روش عددی کلاسیک صورت گرفته است و مقادیر خطای به‌دست آمده در جدول ۵، می‌توان گفت که نتایج مدل‌سازی معادله‌گرا از دقت خوبی برخوردار است و با توجه به مزیت‌های این روش که در بخش قبل به‌طور کامل به آن پرداخته شد، می‌توان از این رویکرد در مدل‌سازی پدیده های مختلف در شبکه‌هایی با ساختار درختی و حلقه‌ای استفاده‌کرد.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، رویکرد معادله‌گرا جهت حل یک‌بعدی معادله دیفرانسیل پخش، در ۳ شبکه مختلف از انواع درختی و حلقه‌ای به کار گرفته شد. برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیل از روش خطوط استفاده شد، که در گام اول مقادیر جبری جایگزین مشتقات مکانی شدند و سپس دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی حاصل‌شده، از طریق اعمال شروط مرزی و اولیه تکمیل شد و در پایان انتگرال‌گیری نسبت به زمان برای معادلات دیفرانسیل معمولی صورت گرفت. لازم به ذکر است که شرط مرزی در نقاط تقاطع شاخه‌ها شامل پیوستگی غلظت و پیوستگی بارگذاری ناشی از پدیده پخش بود. جهت درستی‌سنجی نتایج برای مدل شماره ۳، از یک مدل‌سازی عددی دیگر که به‌روش قدیمی‌تر به حل معادله دیفرانسیل در شبکه می‌پردازد، استفاده شد. نتایج ۲ روش باهم مقایسه شدند و نیم‌رخ غلظت آلودگی در تمامی زمان‌ها بر یکدیگر منطبق بودند و در نقاط تقاطع شاخه‌های مختلف به یکدیگر ناپیوستگی غلظت وجود نداشت. همچنین در سرشاخه‌ها که مقادیر بارگذاری ناشی از پخش یا مقدار غلظت اعمال شد، به‌طور کامل با نتایج خروجی همخوانی داشت. مقادیر R^2 ، RMSE و MAE بین نتایج دو روش مدل‌سازی محاسبه شدند. مقادیر ضریب همبستگی (R^2) بین نتایج دو روش مدل‌سازی در زمان‌های مختلف بین ۰/۹۹ تا ۱ قرار داشت که بیانگر این است که روند تغییرات غلظت در هر دو روش کاملاً یکسان است. ۲ پارامتر دیگر شامل خطای جذر میانگین مربعات (RMSE) و میانگین خطای مطلق (MAE) بین نتایج ۲ روش محاسبه شد که مقادیر این خطاها نیز تقریباً برای تمامی زمان‌ها صفر بود که مقدار بهینه‌ای برای هر دو پارامتر خطا است. لذا با توجه به نتایج به‌دست‌آمده، روش معادله‌گرا برای حل معادله دیفرانسیل در شبکه پاسخ مناسبی داشت و از دقت بالایی برخوردار بود. اولین مزیت روش مدل‌سازی معادله‌گرا انعطاف پذیری بالای این روش است که کاربر قادر است جمله های مختلفی را به معادله دیفرانسیل اضافه کرده و نتیجه اضافه‌کردن یک جمله به معادله دیفرانسیل را در مدل سازی مشاهده کند و از این طریق پیچیدگی‌های بیشتری را در مدل‌سازی لحاظ کند. مزیت دوم این است که مدل سازی شبکه‌های پیچیده با ساختار درختی و حلقه‌ای به سختی مدل‌سازی‌های کلاسیک نیست و کدنویسی حل معادله دیفرانسیل در این شبکه‌ها با توجه به تنظیم شرایط مرزی بین شاخه‌ها کاهش یافته و باعث تسهیل مدل‌سازی در این شبکه‌ها می‌شود. سومین مزیت این است که مراحل طی شده برای حل معادله دیفرانسیل در شبکه با بیشتر نرم‌افزارهای مختص حل معادله دیفرانسیلی قابل‌حل و اجراست و با توجه به این موضوع که در سال‌های اخیر، رویکرد استفاده از نرم‌افزارهای عمومی جهت حل معادلات دیفرانسیل با استفاده از نرم‌افزارهای تجاری یا متن‌باز (Open Source) رایج شده‌است، لذا این تحقیق رویکردی جدید و مناسب برای تبدیل معادلات شبکه به فرمی است که در این نرم‌افزارها قابل‌حل باشد. در پایان باید عنوان داشت که رویکرد ارائه شده در این تحقیق تنها مختص حل معادله دیفرانسیل پخش در شبکه نیست و با این روش می‌توان هر نوع معادله‌ای اعم از جابه‌جایی- پراکندگی و... را در شبکه موردنظر حل کرد.

مراجع

Addiscott, T. M., & Leeds-Harrison, P. (2005). DIFFUSION. *Encyclopdeia of Soils in the Environment*, 389-394. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B0-12-

348530-4/00346-5

Alharbi, A. Y., Pence, D. V., & Cullion, R. N. (2003). Fluid Flow Through Microscale Fractal-Like Branching Channel Networks. *Journal of Fluids Engineering*, 125(6), 1051-1057. https://doi.org/10.1115/1.1625684.

Campos, D., Mendez, V., & Fort, J. (2004). Description of diffusive and propagative behavior on fractals. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 69(3 Pt 1), 031115. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.031115

Carslaw, H. S., & Jaeger, J. C. (1959). Conduction of Heat in Solids (second edition ed.). Oxford University

Chen, Y., & Cheng, P. (2002). Heat transfer and pressure drop in fractal tree-like microchannel nets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(13), 2643-2648. https://doi.org/10.1016/s0017-9310(02)00013-3.

Chung, S.-Y., Chung, Y.-S., & Kim, J.-H. (2007). Diffusion and Elastic Equations on Networks. *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences*, 43(3), 699-725. doi:10.2977/prims/1201012039

Chung, S.-Y., & Choi, M.-J. (2017). A new condition for blow-up solutions to discrete semilinear heat equations on networks. *Computers & Mathematics with Applications*, 74(12), 2929-2939. https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.07.030

Crank, J. (1975). The Mathematics of Diffusion. Oxford University Press .

Dadvar, M., & Sahimi, M. (2007). The effective diffusivities in porous media with and without nonlinear reactions. *Chemical Engineering Science*, 62(5), 1466-1476. https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.002.

F.Miguel, A., & O.Rocha, L. A. (2018). Tree-Shaped Fluid Flow and Heat Transfer. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73260-2

Fan, W., & Liu, F. (2018). A numerical method for solving the two-dimensional distributed order space-fractional diffusion equation on an irregular convex domain. *Applied Mathematics Letters*, 77, 114-121. https://doi.org/10.1016/j.aml.2017.10.005.

Fischer, H. B. (1979). Mixing in inland and coastal waters. Academic Press. Publisher description http://www.loc.gov/catdir/description/els031/78022524.html

Gulick, D., & Scott, J. (2011). The Beauty of Fractals. https://doi.org/10.1017/cbo9780883859711

Hickson, R. I., Barry, S. I., Mercer, G. N., & Sidhu, H. S. (2011). Finite difference schemes for multilayer diffusion. *Mathematical and Computer Modelling*, 54(1-2), 210-220. https://doi.org/10.1016/j.mcm.2011.02.003.

Johnson, A. R., Hatfield, C. A., & Milne, B. T. (1995). Simulated diffusion dynamics in river networks. *Ecological Modelling*, 83(3), 311-325. https://doi.org/10.1016/0304-3800(94)00107-9.

Liu, C., Xie, D., She, W., Liu, Z., Liu, G., Yang, L. & Zhang, Y. (2018). Numerical modelling of elastic modulus and diffusion coefficient of concrete as a three-phase composite material. *Construction and Building Materials*, 189, 1251-1263.

Mamo, D., & Purnachandra Rao, K. (2015). Mathematical Modeling and Simulation Study of SEIR disease and Data Fitting of Ebola Epidemic spreading in West Africa. *Journal of Multidisciplinary Engineering Science and Technology*, 2, 3159-0040.

Milišić, H., Hadžić, E., & Jusić, S. (2020). 2020//. Estimation of Longitudinal Dispersion Coefficient Using Field Experimental Data and 1D Numerical Model of Solute Transport. Paper presented at the Advanced Technologies, Systems, and Applications IV-Proceedings of the International Symposium on Innovative and Interdisciplinary Applications of Advanced Technologies (IAT 2019), Cham.

Naveros, I., C.Ghiaus, Ordonez, J., & Ruiz, D. P. (2016). Thermal Networks From The Heat Equation By Using The Finite Element Method. WIT Press, 106, 33-43. https://doi.org/10.2495/HT160041.

Neira, J., Ortiz, M., Morales, L., & Acevedo, E. (2015). Oxygen diffusion in soils: understanding the factors and processes needed for modeling. *Chilean journal of agricultural research*, 75, 35-44.

Polianin, A. D., & Zaĭtsev, V. F. (2003). Handbook of exact solutions for ordinary differential equations (2nd ed.). Chapman & Hall/CRC. Publisher description http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0646/2002073735-d.html

Romeo, G. (2020). Mathematics for dynamic economic models. In Elements of Numerical Mathematical Economics with Excel (pp. 139-215). Academic Press. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-817648-1.00004-9

Sanders, F. E., Tinker, P. B., & Nye, P. H. (1971). Uptake of solutes by multiple root systems from soil: I. An electrical analog of diffusion to root systems. *Plant and Soil*, 34, 453-466.

Schiesser, W. E., & Griffiths, G. W. (2009). A compendium of partial differential equation models: method of lines analysis with Matlab. Cambridge University Press. Table of contents only http://www.loc.gov/catdir/toc/fy0905/2008045816.html

Shashkov, M., & Steinberg, S. (1996). Solving Diffusion Equations with Rough Coefficients in Rough Grids. *Journal of Computational Physics*, 405-383, (2)129, https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0257.

Simon,T., & Koya, P.R. (2015). Modeling and Numerical Simulation of River Pollution Using Diffusion-Reaction Equation. *American Journal of Applied Mathematics*, 3(6), 335-340.

Thawornchak, W. (2001). Equation-Based and Agent-Based Modeling of Supply Networks.

Vaidya, N.K., Morgan, M., Jones, T., Miller, L., Lapin, S., & Schwartz, E.J. (2015). Modelling the epidemic spread of an H1N1 influenza outbreak in a rural university town. Epidemiol Infect, 143(8), 1610-1620.

Xu, P., Sasmito, A. P., Yu, B., & Mujumdar, A. S. (2016). Transport Phenomena and Properties in Treelike Networks. *Applied Mechanics Reviews*, 68(4). https://doi.org/10.1115/1.4033966.

Xu, P., Wang, X. Q., Mujumdar, A. S., Yap, C., & Yu, B. M. (2009). Thermal characteristics of tree-shaped microchannel nets with/without loops. *International Journal of Thermal Sciences*, 48(11), 2139-2147. https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2009.03.018.

Yu, X. f., Zhang, C. p., Teng, J. t., Huang, S. y., Jin, S. p., Lian, Y. f., Cheng, C. h., Xu, T. t., Chu, J. C., Chang, Y. J., Dang, T., & Greif, R. (2012). A study on the hydraulic and thermal characteristics in fractal tree-like microchannels by numerical and experimental methods. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(25-26), 7499-7507. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.07.050.

Zheng, N., Liu, P., Wang, X., Shan, F., Liu, Z., & Liu, W. (2017). Numerical simulation and optimization of heat transfer enhancement in a heat exchanger tube fitted with vortex rod inserts. *Applied Thermal Engineering*, 123, 471-484. https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.05.112.

Zheng, Q., Xu, J., Yang, B., & Yu, B. (2013). Research on the effective gas diffusion coefficient in dry porous media embedded with a fractal-like tree network. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 392(6), 1557-1566. https://doi.org/10.1016/j.physa.2012.12.003.